



Warszawa, 10 lutego 2025 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej Pani mgr Amar Fakhredine

Interplay between non-relativistic spin-splitting and spin-orbit coupling in metallic systems

Praca doktorska Pani Amar Fakhredine została wykonana w Instytucie Fizyki Polskiej Akademii Nauk, w Zespole Heterostruktur Magnetycznych ON-3.4, pod kierunkiem dr hab. Carmine Autieri oraz promotorstwa pomocniczego Dr. Giuseppe Cuono. Rozprawa doktorska przedstawia analizę nierelatywistycznego rozszczepienia spinowego i sprzężenia spin-orbita (SOC, z ang. spin-orbit coupling) w układach metalicznych, ze szczególnym uwzględnieniem ich wzajemnej relacji w magnetyzmie, materiałach topologicznych i zjawiskach transportu spinowego. Tematy te są bardzo istotne we współczesnej fizyce materii skondensowanej, w szczególności w spintronice, materiałach magnetycznych i półmetalach topologicznych. Badając mechanizmy łamania symetrii, rozprawa doktorska zwiększa zrozumienie kluczowych zjawisk, takich jak oddziaływanie Dzyaloshinskii-Moriya (DMI, z ang. Dzyaloshinskii-Moriya interaction), anomalny efekt Halla (AHE, z ang. anomalous Hall effect), półmetale Weyla i altermagnetyzm.

Rozprawa jest dobrze zorganizowana, zaczynając od wprowadzenia do zagadnienia, przechodząc do metodologii a następnie przedstawiając oryginalny wkład badawczy i przyszłe perspektywy badawcze. Badania Autorki poparte są czterema recenzowanymi publikacjami w szanowanych czasopismach, a dodatkowe prace są w toku. Techniki obliczeniowe, w tym teoria funkcjonału gęstości (DFT, z ang. density functional theory) i metody funkcji Wanniera, odgrywają kluczową rolę w modelowaniu rozszczepienia spinowego i badaniu właściwości transportowych zależnych od spinu. Połączenie rygorystycznej analizy teoretycznej, precyzyjnych symulacji i walidacji eksperymentalnych oferuje cenny wgląd w przyszłe badania nad układami uporządkowanymi magnetycznie, fazami topologicznymi i materiałami z silnie skorelowanymi elektronami. Uzyskane wyniki przyczyniają się do projektowania i optymalizacji materiałów z kontrolowanymi oddziaływaniami spin-orbita, wspierając postęp w technologiach kwantowych i energooszczędnych urządzeniach spintronicznych. Niewątpliwym atutem przedstawionych badań jest integracja modelowania teoretycznego z równolegle toczącymi się badaniami eksperymentalnymi, co zapewnia głębszą analizę podstawowych mechanizmów rządzących nierelatywistycznym rozszczepieniem spinów i SOC. Przedstawione w pracy wyniki podkreślają wpływ łamania symetrii odwrócenia w czasie na elektronową strukturę pasmową i zjawiska transportu kwantowego, jednocześnie odnosząc się do wpływu interakcji międzyfazowych, korelacji elektronowej i strukturalnej asymetrii inwersji na właściwości materiałów. Zaprezentowane wyniki mogą mieć wpływ na rozwój urządzeń spintronicznych nowej generacji i topologicznych materiałów kwantowych.

Wprowadzenie ustanawia podstawy teoretyczne, obejmujące kluczowe dla pracy zagadnienia, takie jak magnetyzm, SOC, DMI, AHE, półmetale Weyla i altermagnetyzm. Motywacja stojąca za przeprowadzonymi badaniami jest jasno nakreślona, podkreślając rolę efektów łamania symetrii w modyfikowaniu właściwości elektronowych i magnetycznych. Rozprawa skutecznie opisuje, w jaki

N.G.S.

sposób różne mechanizmy łamania symetrii wpływają na transport spinowy i strukturę elektronową, w szczególności w układach ferromagnetycznych i altermagnetycznych. Dyskusja semimetali Weyla dostarcza analizy związku między łamaniem symetrii a topologicznie chronionymi stanami, prowadzącymi do dużej krzywizny Berry'ego i niekonwencjonalnego zachowania transportowego. Badanie altermagnetyzmu wprowadza nową dziedzinę, pokazując, w jaki sposób nierelatywistyczne rozszczepienie spinu występuje pomimo skompensowanego magnetyzmu. **Metodologia** koncentruje się na technikach obliczeniowych, głównie DFT i ciasnego wiązania. Omówiona jest rola SOC w modyfikowaniu struktury pasmowej i krzywizny Berry'ego. Modele oparte na ciasnym wiązaniu są wykorzystane do analizy właściwości transportu spinowego. W badaniach Autorka korzystała z zaawansowanych narzędzi obliczeniowych, w tym Vienna Ab initio Simulation Package i Quantum ESPRESSO.

Podstawowy wkład niniejszej rozprawy doktorskiej zawarty jest w czterech artykułach, z których każdy stanowi ważny element rozprawy i jest dość obszernie analizowany w jej rozdziałach. Wyniki przedstawione w rozdziałach od 3 do 6 stanowią krok naprzód w zrozumieniu DMI, półmetali Weyla i materiałów altermagnetycznych. Poprzez integrację obliczeń z pierwszych zasad z walidacją eksperymentalną, praca ta zapewnia głębszy wgląd w te zjawiska fizyczne, torując drogę do nowych zastosowań w spintronice, materiałach kwantowych i fizyce topologicznej. Niniejsza rozprawa z powodzeniem nawiązuje do kluczowych wyzwań w tych dziedzinach, podkreślając również kilka obiecujących kierunków przyszłych badań. Należą do nich eksperymentalna weryfikacja właściwości transportu altermagnetycznego, optymalizacja inżynierii międzyfazowej w celu ulepszenia DMI oraz dalsza eksploracja półmetali Weyla pod kątem potencjalnych zastosowań. Łącznie, prace te przyczyniają się do rozwoju dziedziny fizyki materii skondensowanej i tworzą solidną podstawę dla przyszłych badań nad materiałami topologicznymi i spintronicznymi.

Rozdział 3 opiera się na artykule „Huge Dzyaloshinskii-Moriya interactions in Pt/Co/Re thin films” (*Journal of Applied Physics*, 2024), który bada pojawienie się dużych wartości DMI w trójwarstwach Re/Co/Pt za pomocą obliczeń z pierwszych zasad. Praca ta bada, w jaki sposób inżynieria interfejsu, zmiany grubości warstwy i SOC wpływają na siłę DMI, kluczowego czynnika w stabilizacji chiralnych struktur magnetycznych, takich jak skyrmiony. Kluczowym odkryciem jest to, że ren znacząco wzmacnia DMI, przewyższając wolfram i prowadząc do dwukrotnego wzrostu oddziaływania w porównaniu z wcześniej badanymi układami. Wniosek ten jest poparty obliczeniami DFT, które skutecznie wychwytyją efekty międzyfazowe. Co więcej, praca ocenia rolę wymieszania na granicy faz, wykazując, że jakość interfejsu jest decydującym czynnikiem w określaniu wielkości DMI. Te spostrzeżenia oferują cenne wskazówki teoretyczne dla eksperymentatorów pracujących nad urządzeniami spintronicznymi, chociaż wpływ wyników można wzmocnić poprzez bardziej kompleksowe porównanie z danymi eksperymentalnymi i dodatkowe rozważania dotyczące efektów zależnych od temperatury.

Opierając się na ramach teoretycznych ustalonych w Rozdziale 3, **Rozdział 4** włącza dane eksperymentalne w celu walidacji i udoskonalenia ustaleń teoretycznych, jak szczegółowo opisano w artykule „Ewolucja statycznych i dynamicznych właściwości magnetycznych trójwarstw Re/Co/Pt i Pt/Co/Re ze wzmocnioną interakcją Dzyaloshinskii-Moriya” (*Applied Surface Science*, 2025). Łącząc obliczenia z pierwszych zasad z pomiarami magnetooptycznego efektu Kerra, badanie to analizuje zależności między jakością interfejsu, kolejnością układania materiałów oraz mieszanym międzyfazowym a siłą DMI. Jednym z najważniejszych odkryć jest wpływ asymetrii interfejsu: odwrócenie sekwencji układania (Pt/Co/Re vs. Re/Co/Pt) zmienia zarówno wielkość, jak i znak DMI, podkreślając kluczową rolę inżynierii materiałowej w zastosowaniach spintronicznych. Choć praca ta skutecznie łączy teorię z eksperymentem, dalsze badania obrazowania mikroskopowego mogłyby

W.G.S.

dostarczyć głębszego wglądu w rzeczywiste struktury magnetyczne, które powstają w wyniku tych oddziaływań.

Rozdział 5 bada AHE w półmetalach Weyla i opiera się na artykule „Sign change of anomalous Hall effect and anomalous Nernst effect in the Weyl semimetal CeAlSi” (*Physical Review B*, 2023). W badaniu tym analizowane jest wzajemne oddziaływanie między pozycjami punktów Weyla, rozkładem krzywizny Berry'ego i właściwościami transportu elektronowego przy użyciu technik Wannierizacji opartych na DFT. Kluczowym odkryciem jest możliwość modulowania AHE poprzez odkształcenie i domieszkowanie, co sugeruje potencjalną drogę do inżynierii topologicznych urządzeń elektronicznych. Dodatkowo, w badaniu zidentyfikowano zmianę znaku w anomalnym efekcie Nernsta, bezpośrednio wiążąc ją z modyfikacjami w podstawowej strukturze pasmowej. Wyniki te przyczyniają się do szerszego zrozumienia zjawisk transportu topologicznego, choć dalsza walidacja eksperymentalna przy użyciu technik takich jak spektroskopia fotoemisyjna z rozdzielczością kątową lub pomiary oscylacji kwantowych wzmocniłaby wnioski.

Rozdział 6 zagłębia się w wyłaniającą się koncepcję altermagnetyzmu i opiera się na artykule „Interplay between altermagnetism and nonsymmorphic symmetries generating large anomalous Hall conductivity by semi-Dirac points induced anticrossings” (*Physical Review B*, 2023). Altermagnetyzm reprezentuje nową formę magnetyzmu, w której nierelatywistyczne rozszczepienie spinów występuje pomimo skompensowanego namagnesowania. W przeciwieństwie do konwencjonalnych antyferromagnetyków, układy altermagnetyczne łamią symetrię odwrócenia w czasie w charakterystyczny sposób, prowadząc do niezwykle efektów transportowych. Korzystając z obliczeń z pierwszych zasad, niniejsza praca pokazuje, że punkty semi-Diraca w CrAs generują duże anomalne przewodnictwo Halla. Ponadto podkreślono kluczową rolę symetrii niesymorficznych w stabilizacji tych cech, oferując nowy teoretyczny wgląd w magnetyzm topologiczny. Badania te stanowią ważny krok w badaniach układów altermagnetycznych, zapewniając teoretyczne podstawy dla przyszłych badań eksperymentalnych. Konieczne są jednak dalsze wysiłki w celu zidentyfikowania rzeczywistych kandydatów na materiały i zbadania ich potencjału do zastosowań w urządzeniach.

Łącznie badania te przyczyniają się do głębszego zrozumienia fizyki materii skondensowanej, z perspektywy zarówno teoretycznej, jak i eksperymentalnej. Podkreślają one skomplikowaną interakcję między strukturą elektronową, symetrią i SOC, oferując obiecującą mapę drogową dla przyszłego rozwoju materiałów topologicznych i spintronicznych. Rozprawa kończy się **podsumowaniem** kluczowych ustaleń i przyszłych kierunków badań. Badanie nierelatywistycznego rozszczepienia spinów w materiałach ze złamaną symetrią odwrócenia czasu ma szerokie implikacje dla spintroniki i inżynierii właściwości materiałów. Praca dostarcza wglądu w rolę SOC w pojawianiu się egzotycznych zachowań magnetycznych, takich jak DMI i AHE. Dyskusja na temat półmetali Weyla podkreśla ich topologiczne znaczenie i potencjalne zastosowania w urządzeniach elektronicznych nowej generacji. Kierunki przyszłych badań nakreślone w rozprawie podkreślają potrzebę walidacji eksperymentalnej, współpracy interdyscyplinarnej i integracji technologicznej badanych materiałów.

Realizacja urządzeń opartych na altermagnetyzmie stanowi wyzwanie, szczególnie w zakresie kontrolowania domen magnetycznych o różnych wektorach Néela. Choć w rozprawie uznano tę kwestię, bardziej szczegółowe strategie lub podejścia eksperymentalne w celu złagodzenia tych wyzwań wzmocniłyby jej praktyczny wkład. Podobnie, integracja proponowanych materiałów i mechanizmów z istniejącymi technologiami półprzewodnikowymi i pamięciowymi mogłaby być dalej omawiana, szczególnie pod względem technik wytwarzania, skalowalności i porównań efektywności energetycznej. Podczas gdy potencjalne przyszłe kierunki badań zostały pokrótce

W.B.S.

omówione, bardziej szczegółowe omówienie pojawiających się tematów - takich jak, ultraszybka dynamika spinowa lub kwantowe zastosowania obliczeniowe spintroniki - sprawiłoby, że wnioski byłyby bardziej przyszłościowe. Ponadto, chociaż badane są materiały takie jak CeAlSi i CrAs, ich wykonalność przemysłowa pozostaje niepewna. Ocena porównawcza alternatywnych materiałów o podobnych właściwościach, ale lepszej stabilności, łatwości wytwarzania lub potencjale integracji dodałaby praktycznego znaczenia.

Chociaż dynamika spinowa jest wymieniana jako przyszła droga badawcza, włączenie symulacji mikromagnetycznych mogłoby zapewnić głębszy wgląd w ruch ścian domen, stabilność skyrmionów i mechanizmy przełączania magnetyzacji. Trwałość stanów ferromagnetycznych w altermagnetykach, szczególnie w obecności domen i defektów, pozostaje kwestią otwartą, a dodatkowe obliczenia lub propozycje eksperymentalne w tym zakresie mogłyby wzmocnić wnioski z rozprawy. Co więcej, włączenie dalszych obliczeń uwzględniających niekolinearny magnetyzm i efekty relatywistyczne poza standardowymi przybliżeniami SOC zwiększyłoby dokładność przewidywania dla przyszłych zastosowań.

Dodatkowo, chociaż Rozdział 2 zapewnia dość solidne podstawy teoretyczne i obliczeniowe, mógłby zostać wzbogacony o dalsze rozwinięcie konkretnych aspektów technicznych, takich jak zbadanie wpływu SOC na modele ścisłego wiązania oraz wpływu różnego rodzaju funkcyjałów wymiany i korelacji na elektronową strukturę pasmową. Systematyczne porównanie funkcyjałów hybrydowych z metodami opartymi na uogólnionym przybliżeniu gradientowym (GGA, z ang. generalized gradient approximation), szczególnie w przypadku materiałów spolaryzowanych spinowo i topologicznych, dostarczyłoby cennych informacji. Co więcej, bardziej szczegółowe wyjaśnienie doboru parametrów obliczeniowych, eksperymentalna weryfikacja modeli teoretycznych oraz motywacja stojąca za wyborem konkretnych materiałów jeszcze bardziej poprawiłaby przejrzystość i kompletność rozprawy.

Podczas redakcji rozprawy Autorce nie udało się uniknąć drobnych usterek. Terminy takie jak „non-relativistic” i „nonrelativistic”, „semi-metal” i „semimetal”, oraz „density-functional theory” i „density functional theory” powinny być używane w jednej wybranej przez Autorkę formie a nie wymiennie. Brak jest również spójności w używaniu skrótów takich jak DFT, SOC, DMI czy AHE, które zdarza się, że są definiowane kilkakrotnie w tekście. Te drobne niedociągnięcia nie wpływają istotnie na odbiór rozprawy doktorskiej, która prezentuje wysoki poziom merytoryczny.

Podsumowując, przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska została napisana w języku angielskim w sposób zrozumiały, jest logicznie skomponowana i przejrzyste zredagowana. Zawiera szereg oryginalnych i wartościowych wyników opublikowanych w bardzo dobrych, recenzowanych czasopismach naukowych. W swoich badaniach Doktorantka stosowała zaawansowane metody teoretyczne oraz wykonała wiele czasochłonnych obliczeń numerycznych. Autorka bardzo dobrze orientuje się w zagadnieniach związanych z tematyką rozprawy i obficie cytuje najnowsze pozycje trafnie dobierając je do omawianych zagadnień, co świadczy o tym, że na bieżąco śledzi literaturę. **Tym samym stwierdzam, że rozprawa doktorska spełnia wszystkie warunki określone w art. 13 ust. 1 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. 2003 nr 65 poz. 595, z późn. zm.) i wnoszę o dopuszczenie mgr Amar Fakhredine do dalszych etapów przewodu doktorskiego. Jednocześnie, wnioskuję o wyróżnienie niniejszej pracy.**

W. Gonzalez Sr.